

Programma del corso di Drug Design

- 1) Principi base del processo di Drug Discovery
- 2) Drug Target
 - Enzimi
 - Recettori....
- 3) Principi di Farmacocinetica (ADMET)
- 4) Progettazione di SM (small molecules)
 - Relazioni Struttura-Attività SAR,
 - Interazione drug-target
 - Definizione di Farmacoforo,
 - Isosteria/Bioisosteria
 - Strategie di lead optimization (case histories)
- 5) Computer Aided Drug Design (CADD)
 - Costruzione di Modelli Farmacoforici
 - Docking
 - Homology modeling
 - Virtual screening of database
 - QSAR
 - Valutazione/predizione delle proprietà ADMET in silico

Modalità d'esame

L'esame consiste in un'unica prova finale orale così articolata:

1. Presentazione in power point di un case study di drug design/discovery riportato su rivista scientifica di settore ed assegnato a ciascun candidato almeno 15 giorni prima della data di esame
2. Esame orale sui punti del programma

Indicazione dei risultati

Conoscenze base del processo di drug discovery.

Principi base dell'interazione Farmaco/Target molecolare

Principi base di farmacocinetica

Principi di design di nuovi modulatori dei target molecolari.

Principali tecniche in silico di drug design.

English version

Program of the Course “Drug Design”

1. Drug discovery process key elements
2. Drug Target
 - Enzymes
 - Receptors....
3. Basic Pharmacokinetics Principles (ADMET)
4. Design of SM (small molecules)
 - Structure-Activities Relationships (SAR)
 - Drug-target interaction
 - Definition of Pharmacophore,
 - Isosterism/bioisosterism in drug design
 - hit/lead optimization (case studies)
5. Computer Aided Drug Design (CADD)
 - Pharmacophore model
 - Docking
 - Homology modeling
 - Virtual screening
 - QSAR
 - ADMET in silico prediction

Examination terms

The exam consists of a single oral test developed as follows:

1. Power point slide deck reporting a case study of drug design/discovery described in the reference paper assigned to each student at least 15 days before the examination date.
2. Oral test covering main program topics

Expected results

Clear knowledge of the drug discovery process.

Basics of:

- Drug/Target interaction
- Pharmacokinetics
- drug design
- in silico drug design approaches